# MinerGeochem V1.0: 一个全新的 矿物地球化学数据信息系统

# 黄小文

中国科学院 地球化学研究所 矿床地球化学国家重点实验室,贵阳 550081

摘 要: 矿物是人类认识地球及地外天体的一把钥匙。随着现代原位分析技术的快速发展,矿物地球化学数据呈现指数增长,积累了大量数据,但这些数据结构复杂,且无统一的标准和格式,阻碍了矿物大数据的再利用和相关的对比研究。鉴于矿物地球化学数据对解决各类地球科学问题的优势,以及它们复杂的数据结构和体量呈指数增长的趋势,本研究基于计算机信息技术、Web应用、关系数据库、GIS等开发了一个矿物地球化学数据信息系统(MinerGeochem)。该系统由信息硬件基础设施、操作系统/数据库系统、服务组件和应用模块组成。功能模块有用户管理模块、网站内容版块、数据管理版块、记录管理版块、系统配置版块、GIS数据可视化和数据导入导出等模块组成。数据维度有矿床数据、矿物数据、实验数据和文献数据四类数据结构,每类数据包含多个属性,数据通过其属性相关联,实现了任一数据属性的搜索和获取。数据标准化及数据上传采用Excel模版批量处理,简单快捷。MinerGeochem界面简单,使用方便,有望成为地学数据库的重要组成部分,为地学工作者提供数据支持。

关键词: 矿物;地球化学;数据库;信息系统;web技术

中图分类号: P595 文章编号: 1007-2802(2024)04-0767-08 doi: 10.3724/j.issn.1007-2802.20240057

# MinerGeochem V1.0: A new mineral geochemistry data information system

## HUANG Xiao-wen

State Key Laboratory of Ore Deposit Geochemistry, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550081, China

Abstract: The mineral is a key to understand the earth and extraterrestrial objects for human beings. With the rapid development of modern in situ analysis techniques, a large amount of mineral geochemical data has been accumulated in an exponential growth mode. However, the complex structures and various types and formats of these data hindered the reuse of mineral big data and related comparative researches. In view of the advantages of mineral geochemical data in solving various questions of geosciences, as well as their complex data structure and exponential growth trend, a mineral geochemical data information system (MinerGeochem, http://www.minergeochem.com/) was developed based on the computer information technology, web application, relational database, and GIS. The system consists of information hardware infrastructure, operating system/database system, service components, and application modules. The functional modules include the user management module, website content module, data management module, record management module, system configuration module, GIS data visualization, and data import and export module. The data dimension consists of four types of data structures including the mineral deposit data, mineral data, experiment data, and literature data. Each type of data contains multiple attributes, and these data are related through their attributes for enabling the search and acquisition of any data attribute. Data standardization and data upload are simply and fast processed in batches using Excel templates. The MinerGeochem which has a simple interface is easily used. The system will be important part of the

收稿编号:2024-0035,2023-3-1 收到,2023-4-3 改回

基金项目:中国科学院百人计划项目;矿床地球化学国家重点实验室领域前沿重点项目(202101);国家自然科学基金资助项目(42173070)

作者简介:黄小文(1985—),男,研究员,研究方向:成因矿物学与关键矿产成矿作用. E-mail:huangxiaowen@mail.gyig.ac.cn.

#### 引用此文:

黄小文. 2024. MinerGeochem V1.0:一个全新的矿物地球化学数据信息系统. 矿物岩石地球化学通报,43(4):767-774.

 $doi:\ 10.3724/j.issn.1007-2802.20240057$ 

Huang X W. 2024. MinerGeochem V1.0: A new mineral geochemistry data information system. Bulletin of Mineralogy, Petrology and Geochemistry, 43(4):767–774. doi: 10.3724/j.issn.1007-2802.20240057

geoscience database and will provide data support for geoscience researchers.

**Key words:** minerals; geochemistry; database; information system; web technology

# 0 引言

进入21世纪以来,随着地球信息探测技术的快速发展,地球科学数据呈指数级增长,地球科学已进入大数据时代(郭华东等,2014;罹明国等,2018)。大数据改变了人类认识和研究地球的思维范式,即从信息化、模式化到智能化的研究思路转变(奚小环,2021)。地球科学大数据与计算机技术的结合,给地球科学带来了前所未有的机遇和挑战(张旗和周永章,2017)。地质和地球化学数据库作为地球信息科学的重要组成部分,可为地球科学研究工作提供可靠的数据基础。国内外学者在20世纪80年代就开始建立各种类型的地学数据库,经过整合、更新形成了当前的一些大型数据库或数据平台,如美国的跨学科地球数据联盟(IEDA)和中国地质调查局开发的地质云平台等。这些数据库的建设极大地促进了重要地球科学问题的解决,给地球科学研究指明了新方向。

矿物是地球和类地行星的重要组成物质,是各种地质过程的关键信息载体。因此,矿物是人类认识地球及地外天体的一把钥匙。在地球的岩石圈,矿物是组成岩石和矿石的基本单元,是研究成岩成矿作用的

绝佳对象。随着现代原位分析技术(如LA-ICP-MS)的快速发展,矿物元素和同位素地球化学数据呈指数增长。矿物地球化学大数据与机器学习方法的结合为成岩成矿作用研究和找矿勘查应用提供了新的思路(Gregory et al.,2019; Huang et al.,2019a,2019b; Hong et al.,2021),是成因矿物学和找矿矿物学研究的前沿。但是,现有的大多数地球化学数据库均缺乏矿物地球化学数据,GEOROC数据库虽涉及矿物地球化学数据版块,但所含矿物种类较少,且缺乏详细的与矿物有关的矿床和岩石信息,限制了矿物地球化学数据的进一步挖掘和利用。矿物地球化学数据非常复杂,具有获取难、无标准格式、专业性、多维度等特点,导致矿物地球化学数据库建设缓慢,须有地质专业背景的人完成数据的获取、规范化等工作。

鉴于国际上矿物地球化学数据库的缺失以及矿物地球化学大数据在地球科学研究中的重要性,本课题组在国内率先开发了一个全新的矿物地球化学数据信息系统MinerGeochem(图1,访问网址:http://www.minergeochem.com/),为今后矿物大数据集成研究提供数据支撑。矿物地球化学数据信息系统的建立,不仅可以完善地球化学数据库体系,而且有望培养大数

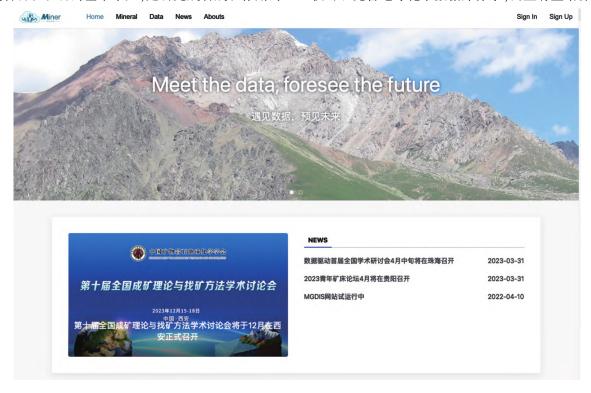


图1 MinerGeochem主界面视图

Fig.1 Main interface view of the MinerGeochem system

矿物岩石地球化学通报 2024,43(4) **769** 

据方面的专业人才,促进一批优秀成果的产出。本文介绍了与矿物有关的开放数据资源、MinerGeochem的搭建方法、主要功能模块、关系数据库,以及Miner-Geochem的初步应用成果。

# 1 与矿物有关的开放数据资源

国内外已经建立了大量与矿物有关的开放数据库,按内容可分为矿物基础信息数据库、地球化学综合数据库和行星数据库(表1)。矿物基础信息数据库主要包括矿物的基本属性信息,如产地、物理、化学、光学

及结晶学等信息,主要用于矿物的查询和识别。地球化学综合数据库包括火山岩、沉积岩和变质岩以及部分矿物和陨石的元素和同位素地球化学数据。在EarthChem、GEOROC和MetPetDB这三个综合地球化学数据库中,只有GEOROC数据库包括矿物地球化学数据,涉及的矿物有19类,包括角闪石、磷灰石、黏土矿物、辉石、长石、石榴子石、橄榄石和锆石等造岩矿物,数据存储方式为Excel表格。行星数据库涉及矿物的地球化学数据也非常有限。总之,目前还没有一个专门针对矿物地球化学的数据库或者数据信息系统。

表 1 与矿物有关的开放数据库不完全统计表

Table 1 Incomplete summary of open database related to minerals

数据库名称	网址	描述
矿物基础信息数据库		
IMA list of approved minerals	https://rruff.info/ima/	可搜索的矿物物种信息数据库。包括化学式、晶胞参数、共生 模式等
RRUFF Project	https://rruff.info/	矿物的化学、光谱和衍射数据数据库
Mineral Evolution Database	https://rruff.info/Evolution/	从文献和mindat.org中提取的约20万条矿物种类/位置/年龄记录
American Mineralogist Crystal Structure Database	http://rruff.geo.arizona.edu/ AMS/amcsd.php	晶体结构数据库,包括在American Mineralogist、Canadian Mineralogist、European Journal of Mineralogy和Physics and Chemistry of Minerals以及从其他期刊发表的晶体结构数据
Handbook of Mineralogy		矿物学手册,4988页,每一页介绍一种矿物的结晶学和物理性 质、电子探针化学组成、矿物共生模式和位置等信息
Mineral Properties Database	https://odr.io/MPD	矿物属性数据库,包括年龄、颜色、氧化还原状态、结构复杂性 和发现方法
Mindat.org	https://www.mindat.org/	世界上最大的矿物、岩石、陨石及其发现地的开放数据库
Evolutionary System of Mineralogy Database	https://odr.io/esmd	矿物地球化学和物理特征数据库,包括主微量元素以及同位 素比值
Mineral RI	https://odr.io/mineralRI	包含矿物和合成物折射率的数据库
国家岩矿化石标本资源共享平台	http://www.nimrf.net.en/kwx	中国地学领域规模最大的国家级标本资源共享平台。整合中 国42家重要岩矿化石标本资源保存单位收藏的33.2万件标本 资源,资源产地覆盖98个国家和国内34个省级行政区域
矿物种信息网	http://www.mineralinfo.org.cn/	以地理信息技术为基础,对中国境内已知的古、现代珍稀矿物标本资源产地整合形成产地查询系统。提供基本的地图显示、查询、统计、标注以及矿物标本古今产地的对比、基本矿物知识信息查询
地球化学综合数据库		
MetPetDB	https://tw.rpi.edu/project/MetPetDB	全球地壳变质岩的地球化学数据和图像的关系数据库
EarthChem	https://earthchem.org/	为地球化学、岩石学、矿物学和相关学科提供开放数据服务的 数据系统,包括数据保存、发现、访问和可视化
GEOROC	http://georoc.mpch-mainz.gwdg.de/georoc/	一个全球地球化学数据库,包含已出版的化学和同位素数据 以及岩石、矿物和熔融/流体包裹体的大量数据
行星数据库		
CheMin Database	https://odr.io/chemin	由美国国家航空航天局火星科学实验室的CheMin仪器分析的 火星岩石和土壤样品的X射线衍射数据的数据库
Astromaterials Data System	https://www.astromat.org/	一个数据基础设施,存储、管理和提供对美国国家航空航天局 约翰逊航天中心实验室数据的访问,包括阿波罗月球样品和 南极陨石
Planetary Data System	https://pds.nasa.gov/	美国国家航空航天局的行星任务以及其他类型的飞行和地面 任务采集的数据

注:据Prabhu et al.,2023修改。

# 2 MinerGeochem搭建方法

## 2.1 系统架构搭建

系统采用B/S架构模式,基于服务端、浏览器访问方式,采用分层、组件化设计,模块低耦合、高内聚,满足各模块的快速开发及平台的高并发、高稳定要求(图2)。整个MinerGeochem系统包括应用层、服务层、数据库和基础设施四个分层(图2)。

## 2.2 系统管理搭建

系统管理搭建主要包括配置管理、备份管理及运 行监控三个部分。

- (1)配置管理:对平台的各功能组件和相关参数等进行设置,并提供统一的配置入口。主要功能要求有二,一是组件管理,这是对系统相关模块启动、停止的控制管理,如数据爬虫的控制管理;二是参数配置,这是提供对系统相关组件的运行参数的配置,如矿床类型、矿物类型、类型结构数据的配置。
- (2)备份管理:为平台提供风险预防机制和灾难恢复措施,其主要功能有四,一是人工备份,平台支持在后台手工制定和管理备份任务,并记录任务执行情况;二是自动备份,可以预定义自动备份策略并由系统

自动执行备份任务;三是备份日志,系统平台需要对备份工作进行日志记录,并提供日志查询功能;四是恢复功能,根据备份恢复策略方便快捷地恢复应用程序文件、配置文件等。

(3)运行监控:对系统平台的运行使用情况进行 实时展示,如CPU的使用率、网络访问、系统盘存读、网 速占用等。

# 2.3 系统安全搭建

作为重要的科研数据系统,需要进行极高的安全 防护,从网络安全、系统安全、应用安全、数据安全、传 输安全五个层面进行保护。

在网络安全层面,将数据库与爬虫采集机物理隔离,Web服务或其他组件服务与后台数据库应用服务进行逻辑隔离,以部署在不同的安全子域。

在系统安全层面,对与系统平台相关的服务器操作系统、数据库、网络设备、中间件等进行安全加固,在账号安全、口令安全、配置安全、日志安全、IP协议安全等方面满足配置规范要求。

在应用安全层面,作为基于Web技术实现的平台, 管理方已制定使用安全规章管理制度,防止人员意外 泄露应用数据造成安全隐患。

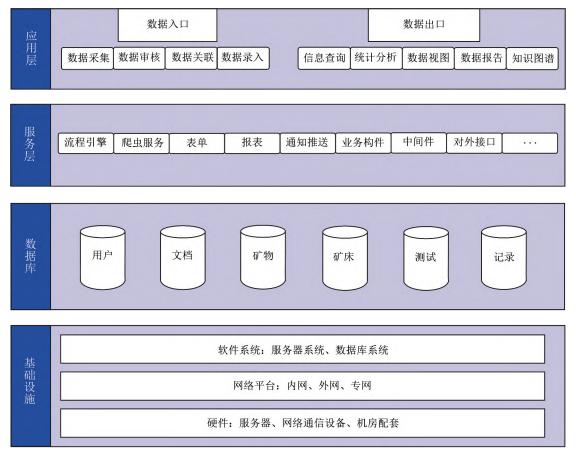


图2 MinerGeochem系统架构图

Fig.2 Frame diagram of the MinerGeochem system

在数据安全层面,系统平台有数据备份与恢复机制、安全访问机制,核心数据可使用加密算法进行存储。

在传输安全层面,系统组件之间的通讯连接采用加密方式、密钥强度不低于128位;系统与外部接口之间的通讯,也采用安全的加密方式连接。

Web服务访问采用SSL证书,https认证方式,保证数据传输过程加密安全。

# 3 MinerGeochem功能版块

## 3.1 用户管理版块

管理员用户:可以管理所有用户数据,新增用户、 修改用户资料、为用户重置密码、审核申请用户信息、 禁止用户登录、删除用户、系统数据配置、门户网站内 容更新维护等操作功能。

普通用户:普通用户可以维护个人信息资料、修 改密码等操作。

#### 3.2 网站内容版块

内容版块主要为前端门户网站内容提供技术支撑,使用对象主要是系统运营人员,通过内容版块的维护、减少前端页面修改频次。按内容划分,主要有新闻管理、团队介绍管理、产品介绍、帮助文档、Banner管理、意见收集等,通过各版块内容的增加、修改、删除等操作,前端门户相应的版块内容也跟着相应的变化。

#### 3.3 数据管理版块

数据管理主要划分为我的数据、共享数据、待审数据、全部数据、统计分析、数据查询与导出。按数据 维度主要划分为矿床数据、矿物数据、实验数据、文献 资料记录数据。

## 3.4 记录管理版块

记录版块主要为运营及管理人员使用,可查询访问记录、访问来源、用户IP等访问信息以及文件记录、文件查看、文件下载、文件删除等操作。

# 3.5 系统配置版块

主要包含系统信息配置、功能管理、菜单配置、数据字典、输出配置、角色管理、树形结构分类、导入/导出配置数据以及任务管理等相关基础功能配套操作。

#### 3.6 GIS数据可视化

矿床数据GIS可视化,根据后台矿床数据经纬度信息,实现矿床在世界地图的分布概况,以及查看矿床相关的矿物数据、实验数据、文献相关资料等数据内容集合体。

## 3.7 意见反馈

主要是用户在系统使用中遇到的问题进行在线反馈,提交到系统中,便于进行系统的优化、升级与维护。

## 3.8 用户中心

主要包括个人基本信息的查看与修改、个人数据 的管理、共享数据的查询、统计以及数据导出等的功能 操作。

# 4 MinerGeochem关系数据库

#### 4.1 数据标准化处理流程

由于原始的矿物地球化学数据载体均为非标准化的文献电子资料,属于非结构化数据,需要根据期刊文献内容,按照统一的规范和格式将数据加工处理,提取文献中与数据有关的重要地质和分析技术方面的信息,形成具有统一范式的数据集,在尊重原始数据的同时使不同作者数据格式统一,让原始无序的数据资源转化成具有相同结构的数据,实现数据的批量入库。具体数据处理流程见图3。数据的输入和输出采用层级结构,将地球化学数据与矿物关联、矿物与矿床关联,再将文献与三者关联。数据的输入既可以直接在网站页面逐条输入,也可以批量输入。矿床、矿物、实验和文献数据均设计了Excel模版,可以实现各类型数据的批量输入。数据输出包括数据的Web GIS可视化和结构化数据导出。

# 4.2 以矿物地球化学数据为主要对象的数据结构

1:N是指数据1对多的结构关系,通过矿床数据、矿物数据、实验数据、关联的文献数据实现矿物地球化学数据无缝链接(图4)。矿床、矿物、实验和文献数据属性全面:矿床数据包括矿床名称、矿床类型、金属类型、矿床亚类型、位置(经纬度、国别、省份)及摘要信息等六个属性;矿物数据包括所属矿床、矿物类型、矿物结构、是否含矿、矿物世代及摘要信息等六个属性;实验数据包括矿床/矿物信息、分析方法、检测单位、编号信息及元素信息(包含H~U等88种元素)等五个属性;文献数据包括文章标题、全部作者、发表时间、期刊信息(名称、卷、期、页码)、链接网址、来源及摘要信息七个属性。目前矿物类型包含372种/族主要的成岩成矿矿物(Whitney and Evans,2010)。可无限扩充增加各类型数据及其属性。

#### 4.3 数据一站式搜索与获取

数据上、下游检索,可通过任何一项数据参数、属性获取到关联的所有数据。支持矿床名称自定义、模糊搜索,支持矿物类型、金属类型、矿物类型、矿物结构、分析方法、是否矿化等选项搜索(图5)。通过数据关联模型,可根据当前数据项主体查找上下游数据,如可通过某一矿床类型查找到所有的矿床、矿物、实验数据及文档数据。也可以根据当前的某一数据项的参数属性为线索,获取大量的矿床、矿物、实验相关数据进

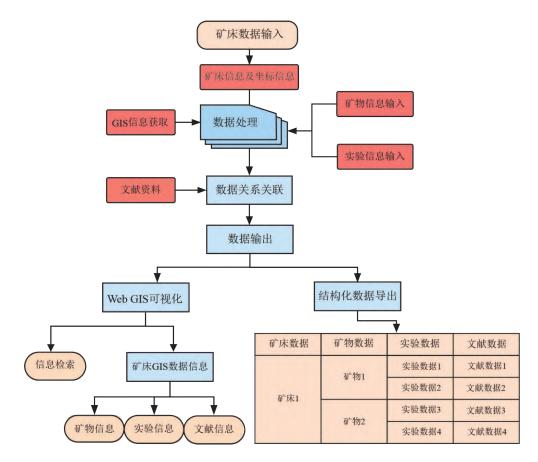


图3 数据标准化处理流程图

Fig.3 Flow chart showing the data normalization

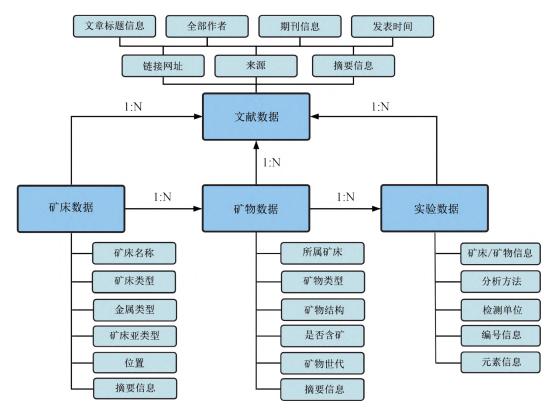


图4 不同类型数据结构关系图

Fig.4 A diagram for structural relationships between different types of data

矿物岩石地球化学通报 2024,43(4) 773

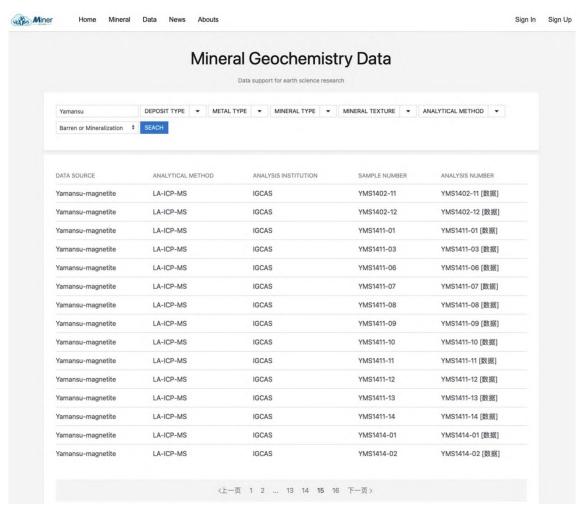


图5 数据检索页面视图

Fig.5 A page view showing the data search

行模型分析。另外,在Web GIS可视化数据界面也可以进行数据属性搜索,查看它们在世界地图上的分布。

通过搜索结果可以将一个矿床或矿物所关联的 所有地球化学数据(矿床名称、矿床类型、金属类型、矿 床亚类型、地理位置、矿物类型、矿物结构、是否矿化、 矿物世代、地球化学数据、分析方法、分析机构、样品编 号、分析编号、文献作者、文献标题、发表日期、期刊名 称、卷期数及页码)导出为一个结构化的二维表文件, 极大方便使用者进行数据收集。

# 5 MinerGeochem的应用

MinerGeochem数据信息系统目前收录有矿床数据437条、矿物数据582条、测试数据38000条,文献数据205条,数据仍在不断增长中。涉及的矿物主要有磁铁矿、磷灰石、闪锌矿、辉钼矿、黄铁矿和方铅矿等。目前利用数据库中的磁铁矿、磷灰石、闪锌矿和辉钼矿微量元素数据进行了岩石和矿床类型的判别研究,并取

得了初步的进展(Xie et al.,2022;Tan et al.,2023a, 2023b;Meng et al.,2024)。

# 6 结语与展望

矿物地球化学数据信息系统MinerGeochem V1.0 的建立是初步的,与国际上的地球化学综合数据库仍存在一定的差距,功能有待进一步提高和完善。主要体现在以下几个方面:

- (1)数据类型相对单一。目前主要是涉及了矿物的元素含量数据,未涉及同位素地球化学数据,包括稳定同位素和放射性同位素。另外,矿物的深时地球化学数据和空间地球化学数据也未涉及。在下一版本中将增加相应模块。
- (2)数据标准化过程复杂。尽管有相应的数据模版进行批量导入,但是所有的数据信息需要人工输入,时间和人力成本比较高。如何智能地整合文献PDF和数据表格形成一个标准化结构化的数据仍是今后系统研发努力的方向。

(3)MinerGeochem的应用有限。由于数据库处于试运行阶段,且数据规模较小,使得其在地球科学中的应用受到限制。目前只进行了一些岩石和矿床类型的判别研究,未来需拓展更多的应用,比如矿床成因研究以及找矿勘查方面。

鉴于笔者知识有限,在矿物地球化学数据信息系统的建设过程中仍有考虑不周的地方,另外本身网站在使用过程中可能也存在一些小问题,恳请各位同行专家提出宝贵意见和建议。

利益冲突声明: 作者保证本文无利益冲突。

致谢:感谢课题组成员冯秋霞在资料准备和图件绘制方面 发挥的积极作用,感谢黔爽爽网络科技公司王勇和贵州黔山 湖科技有限公司陆志刚在矿物地球化学数据信息系统的建 设和维护等方面提供的支持和帮助。感谢矿床地球化学国 家重点实验室孟郁苗、谭亲平、潘力川、谢卓君在数据属性设 置方面给予的建议。

#### 参考文献 (References):

- Gregory D D, Cracknell M J, Large R R, McGoldrick P, Kuhn S, Maslennikov V V, Baker M J, Fox N, Belousov I, Figueroa M C, Steadman J A, Fabris A J, Lyons T W. 2019. Distinguishing ore deposit type and barren sedimentary pyrite using laser ablation-inductively coupled plasma-mass spectrometry trace element data and statistical analysis of large data sets. Economic Geology, 114(4): 771–786
- 郭华东, 王力哲, 陈方, 梁栋. 2014. 科学大数据与数字地球. 科学通报, 59 (12): 1047–1054 [Guo H D, Wang L Z, Chen F, Liang D. 2014. Scientific big data and digital Earth. Chinese Science Bulletin, 59(12): 1047–1054 (in Chinese with English abstract)]
- Hong S, Zuo R G, Huang X W, Xiong Y H. 2021. Distinguishing IOCG and IOA deposits via random forest algorithm based on magnetite composition. Journal of Geochemical Exploration, 230: 106859
- Huang X W, Boutroy É, Makvandi S, Beaudoin G, Corriveau L, De Toni A F. 2019a. Trace element composition of iron oxides from IOCG and IOA deposits: relationship to hydrothermal alteration and deposit subtypes. Mineralium Deposita, 54(4): 525–552

- Huang X W, Sappin A A, Boutroy É, Beaudoin G, Makvandi S. 2019b. Trace element composition of igneous and hydrothermal magnetite from porphyry deposits: Relationship to deposit subtypes and magmatic affinity. Economic Geology, 114(5): 917–952
- Meng Y M, Huang X W, Hu R Z, Beaudoin G, Zhou M F, Meng S N. 2024.

  Deposit type discrimination based on trace elements in sphalerite. Ore
  Geology Reviews, 165: 105887
- Prabhu A, Morrison S M, Fox P, Ma X G, Wong M L, Williams J R, McGuinness K N, Krivovichev S V, Lehnert K, Ralph J, Lafuente B, Downs R T, Walter M J, Hazen R M. 2023. What is mineral informatics? American Mineralogist, 108(7): 1242–1257
- Tan H M R, Huang X W, Meng Y M, Xie H, Qi L. 2023a. Multivariate statistical analysis of trace elements in apatite: Discrimination of apatite with different origins. Ore Geology Reviews, 153: 105269
- Tan M, Huang X W, Meng Y M, Tan H. 2023b. Trace element composition of molybdenite: Deposit type discrimination and limitations. Minerals, 13 (1): 114
- Whitney D L, Evans B W. 2010. Abbreviations for names of rock-forming minerals. American Mineralogist, 95(1): 185–187
- Xie H, Huang X W, Meng Y M, Tan H, Qi L. 2022. Discrimination of mineralization types of skarn deposits by magnetite chemistry. Minerals, 12(5): 608
- 奚小环. 2021. 大数据科学从信息化、模式化到智能化: 现代地球化学应用研究的新范式. 地学前缘, 28(1): 308-317 [Xi X H. 2021. Big data science from informationization to modelling to intelligentization: New paradigm of applied geochemical research. Earth Science Frontiers, 2021, 28(1): 308-317 (in Chinese with English abstract)]
- 翟明国, 杨树锋, 陈宁华, 陈汉林. 2018. 大数据时代: 地质学的挑战与机遇. 中国科学院院刊, 33(8): 825-831 [Zhai M G, Yang S F, Chen N H, Chen H L. 2018. Big data epoch: Challenges and opportunities for geology. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 33(8): 825-831 (in Chinese with English abstract)]
- 张旗, 周永章. 2017. 大数据正在引发地球科学领域一场深刻的革命:《地质科学》2017年大数据专题代序. 地质科学, 52(3): 637-648 [Zhang Q, Zhou Y Z. 2017. Big data will lead to a profound revolution in the field of geological science. Chinese Journal of Geology, 52(3): 637-648 (in Chinese with English abstract)]

(本文责任编辑: 谭亲平; 英文审校: 张兴春)